



Validation d'un modèle numérique 1D de transfert de masse et de chaleur

Sophie Moissette, Marjorie Bart

► To cite this version:

Sophie Moissette, Marjorie Bart. Validation d'un modèle numérique 1D de transfert de masse et de chaleur. AUGC 2009, 2009, Saint Malo, France. pp.03/40. hal-00801345

HAL Id: hal-00801345

<https://hal.science/hal-00801345>

Submitted on 15 Mar 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Validation d'un modèle numérique 1D de transfert de masse et de chaleur

MOISSETTE S.*, BART M.*

** LGCGM, Laboratoire de Génie Civil et Génie Mécanique, Equipe Matériaux thermorhéologie, INSA Rennes,
20 avenue des buttes de Coësmes, 35043 Rennes
sophie.moissette@univ-rennes1.fr
marjorie.bart@univ-rennes1.fr*

RÉSUMÉ. Dans le cadre de la caractérisation hygrothermique de matériaux à faible qualité environnementale, un modèle numérique unidimensionnel de transfert de masse et de chaleur nommé TMC a été mis au point au laboratoire. Ce modèle est actuellement en cours de validation. Cet article présente d'une part le modèle numérique développé et le compare, d'autre part, à une solution analytique et à d'autres modèles existants sur un cas test simple fourni par la littérature. Celui-ci consiste à modéliser la distribution d'humidité sur un mur homogène sous conditions isothermes en 1D. Initialement, le mur est en équilibre avec les ambiances intérieures et extérieures. A $t > 0$, les ambiances sont modifiées. La distribution d'humidité au sein du mur à 100 h, 300 h et 1000 h est alors étudiée.

ABSTRACT. In the context of hygrothermal characterization of environmental friendly materials, a numerical model, called TMC, for describing mass and heat transfer is developed in our laboratory. This paper presents at first the numerical unidimensionnal model and secondly, compares it to analytical solution and other models on a simple test case. This case consists in modelling humidity distribution in homogenous wall under isothermal conditions. Initially, the wall is in equilibrium with indoor and outdoor surroundings. Then, conditions are modified and humidity distribution in a wall at 100 h, 300 h and 1000 h is studied.

MOTS-CLÉS : transfert, masse, chaleur, modèle numérique.

KEYWORDS: transfert, mass, heat, numerical model.

1. Introduction

Dans le contexte actuel de développement durable, le choix de matériaux de construction à faible impact environnemental peut s'avérer judicieux. Ces matériaux, lors de leur mise œuvre et de leur utilisation, présentent peu d'émissions polluantes, un faible coût énergétique et sont de bons isolants... Actuellement, certains de ces matériaux sont étudiés au laboratoire : béton de chanvre, bauge (terre stabilisée au ciment, matériau traditionnel du bassin rennais). Soumis aux conditions climatiques extérieures et aux utilisations des occupants, ces matériaux poreux, sont des lieux d'échange de masse et de chaleur. Les effets de l'humidité peuvent être nombreux : diminution des performances thermiques, moisissure, mauvaise qualité de l'air intérieur. Afin d'analyser ces phénomènes, un axe de recherche sur la caractérisation hygrothermique des matériaux a été lancé au laboratoire.

C'est dans ce contexte qu'un modèle numérique, basé sur les travaux de Künzle (1995) est développé. Ce modèle, nommé TMC, se limite à la modélisation du transfert de masse et de chaleur en régime instationnaire au sein d'un matériau monocouche en configuration 1D. Cet article rappelle le système d'équations couplées régissant les transferts de masse et de chaleur. De plus, il présente succinctement la résolution numérique de ce système par discrétisation en volume finis. Enfin, la dernière partie concerne une partie de la validation numérique de notre travail sur un cas test, proposé lors d'un benchmark nommé HAMSTAD WP2 (Cornick, 2006).

2. Présentation du modèle

2.1. Hypothèses – équations générales

Le modèle, présenté ici, se limite à la modélisation du transfert de chaleur et d'humidité en régime instationnaire, au sein d'un milieu poreux monocouche, en configuration 1D. De plus, le transfert d'air au sein du matériau n'est pas pris en compte. Enfin, le domaine de température utilisé ($>0^{\circ}\text{C}$) exclut la présence de gel.

Conformément aux travaux de Künzle (1995), la température T et l'humidité relative ϕ ont été choisies comme potentiels gouvernant les transferts de chaleur et de masse. Soient p la pression partielle de vapeur d'eau et p_{sat} la pression partielle de vapeur saturante, l'humidité relative est définie par :

$$\phi = \frac{p}{p_{\text{sat}}} \quad [1]$$

2.2. Equation de conservation de la chaleur

Sous les hypothèses définies précédemment au § 2.1, l'équation de conservation de chaleur s'écrit :

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial x} + S_v \quad [2]$$

où	H	: enthalpie du matériau humide	J.m ⁻³
	q	: densité de flux de chaleur	W.m ⁻²
	S _v	: terme source	W.m ⁻³

Le terme $\partial H/\partial t$ correspond à l'accumulation de chaleur au sein du matériau humide. Il correspond à la variation de l'enthalpie du matériau sec H_0 et de l'enthalpie de l'eau contenue dans le matériau sous forme vapeur H_v ou liquide H_l . Etant donnée la faible valeur de la masse volumique de la vapeur, son enthalpie est négligeable devant les autres termes H_0 et H_l . Ces enthalpies s'expriment en fonctions des capacités thermiques massiques soit :

$$H_0 = \rho_0 \cdot C_0 \cdot T \quad [3]$$

$$H_l = w \cdot C_l \cdot T \quad [4]$$

où	ρ_0	: masse volumique du matériau sec	kg.m ⁻³
	w	: teneur en eau	kg.m ⁻³
	C_0	: capacité thermique massique du matériau sec	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
	C_l	: capacité thermique massique de l'eau liquide	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹

Ainsi, l'enthalpie totale H peut s'écrire :

$$H = (\rho_0 \cdot C_0 + w \cdot C_l) \cdot T \quad [5]$$

soit :

$$H = \rho_0 \cdot C^* \cdot T \quad [6]$$

avec C^* la capacité thermique massique équivalente donnée par :

$$C^* = C_0 + \frac{w}{\rho_0} \cdot C_l \quad [7]$$

La densité de flux de chaleur q est explicité par la loi de Fourier :

$$q = -\lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \quad [8]$$

où λ est la conductivité thermique du matériau humide en $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

Dans le domaine de température usuel des matériaux de construction, la conductivité thermique du matériau humide peut être écrite comme une relation linéaire de la conductivité thermique du matériau sec λ_0 en fonction de la teneur en eau volumique w (Cammerer et al. 1985, Künzle 1986, Collet et al 2005).

Le dernier terme de l'équation de conservation de la chaleur correspond au terme source S_v . Il définit le flux d'enthalpie dû au mouvement d'humidité et au changement de phase vapeur/eau liquide et s'écrit :

$$S_v = -l_v \cdot \frac{\partial g_v}{\partial x} \quad [9]$$

La chaleur latente l_v de changement de phase est prise égale à 2500 kJ.kg^{-1} .

Compte tenu des relations [2], [6], [8] et [9], l'équation de conservation de la chaleur prend alors la forme classique suivante :

$$\rho_0 C^* \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + l_v \frac{\partial}{\partial x} (g_v) \quad [10]$$

2.3. Equation de conservation de la masse

Sous les hypothèses définies précédemment au § 2.1, l'équation de conservation de chaleur s'écrit respectivement :

$$\frac{\partial w}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (g_l + g_v) \quad [11]$$

où g_v : densité de flux de vapeur $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
 g_l : densité de flux d'eau liquide $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$

Soit δ_a la perméabilité à la vapeur de l'air ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{Pa}^{-1}$), la diffusion de vapeur d'eau dans l'air, en supposant que l'air humide soit un gaz parfait, est décrite suivant la loi de Fick par :

$$g_v = -\delta_a \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \quad [12]$$

Pour un matériau dont les pores sont de grande taille, cette relation reste valable. Si le matériau offre des pores plus petits, le phénomène d'effusion (collision entre les molécules de vapeur et les parois des pores) peut être pris en compte par l'introduction d'un facteur de résistance de diffusion noté μ . L'équation [12] devient :

$$g_v = -\frac{\delta_a}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = -\delta_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \quad [13]$$

Des études expérimentales ont montré que la perméabilité à la vapeur δ_p dépend de la teneur en eau w du matériau (McLean 1990, Collet 2008). Dans le cas test proposé ici, la perméabilité de vapeur imposée implique un flux de vapeur négligeable face au flux de liquide.

Basé sur la loi de Darcy décrivant l'écoulement laminaire à travers des milieux poreux saturés, le transfert d'eau liquide peut s'écrire :

$$g_l = K \frac{\partial p_k}{\partial x} \quad [14]$$

où K est la conductivité liquide ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{Pa}^{-1}$)

La pression capillaire p_k est liée à l'humidité relative par la loi de Kelvin :

$$\phi = \exp\left(\frac{-p_k}{\rho_w R_{H_2O} T}\right) \quad [15]$$

où	p_k	pression de succion capillaire	Pa
	ρ_w	masse volumique de l'eau liquide	kg.m^{-3}
	R_{H_2O}	constante de gaz parfait de la vapeur d'eau	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$

En supposant que le transfert d'eau liquide sous gradient de température est négligeable devant le transfert sous gradient d'humidité, les relations [14] et [15] conduisent à :

$$g_l = -K_l \frac{T}{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} = -D_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad [16]$$

où K_l est le coefficient de conduction capillaire ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$).

Le coefficient de diffusion liquide D_ϕ ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$) est modélisé de façon empirique en fonction du degré d'humidité du matériau conformément aux propositions de Kunzel (1995). Cependant pour la simulation du cas du benchmark WP2, ce coefficient est calculé directement à partir des données fournies (D_w), sans nécessiter l'appel à ces modèles, à partir de la relation :

$$D_\phi = D_w \cdot \frac{dw}{d\phi} \quad [17]$$

Compte tenu des relations [11], [13] et [16], l'équation de conservation de la masse est donnée par :

$$\frac{dw}{d\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\delta_p \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \quad [18]$$

La dérivée $dw/d\varphi$ est obtenue à partir des isothermes de sorption et des courbes de succion définissant la relation $w = f(\varphi)$ qui décrit le stockage de l'humidité au sein du matériau.

2.4. Résolution numérique

La résolution numérique du système d'équations couplées est basée sur une discrétisation selon la méthode des volumes finis associée à un algorithme de résolution de type TDMA. La figure 1 indique les notations utilisées. La discrétisation temporelle est basée sur une formulation implicite et un schéma centré d'ordre un est adopté pour la discrétisation spatiale.

Les discrétisations temporelle et spatiale de l'équation [10] donnent la relation suivante :

$$T_i^{n+1} \cdot a(i) = T_{i+1}^{n+1} \cdot b(i) + T_{i-1}^{n+1} \cdot c(i) + d(i) \quad [19a]$$

avec

$$d(i) = \rho_0 C_i^* \frac{\delta x}{\delta t} T_i^n + S_v(i) \quad [19b]$$

$$c(i) = \frac{\lambda_w}{\delta x_w} \quad [19c]$$

$$b(i) = \frac{\lambda_e}{\delta x_e} \quad [19d]$$

$$a(i) = \frac{\lambda_e}{\delta x_e} + \frac{\lambda_w}{\delta x_w} + \rho_0 C_i^* \frac{\delta x}{\delta t} \quad [19e]$$

$$S_v(i) = -l_v \cdot \delta_{pe} \cdot \frac{\Phi_{i+1} P_{sat,i+1} - \Phi_i P_{sat,i}}{\partial x_e} - l_v \cdot \delta_{pw} \cdot \frac{\Phi_i P_{sat,i} - \Phi_{i-1} P_{sat,i-1}}{\partial x_w} \quad [19f]$$

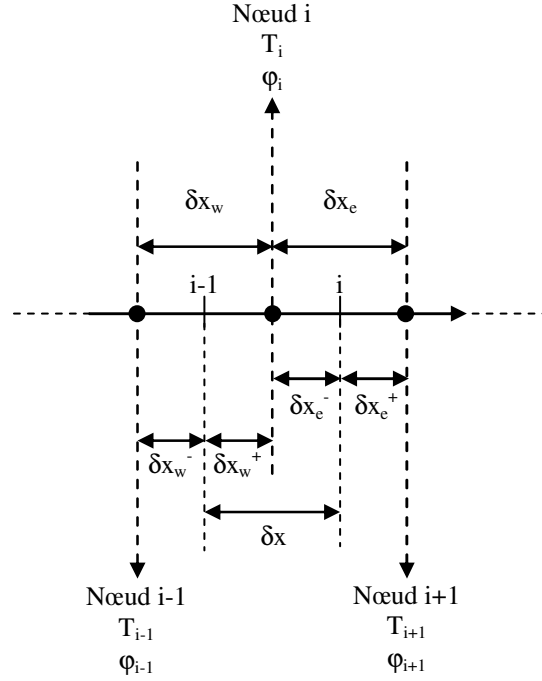


Figure 1 : Schéma de la discrétisation spatiale.

Les discrétisations temporelle et spatiale de l'équation [18] donnent :

$$\varphi_i^{n+1} \cdot a(i) = \varphi_{i+1}^{n+1} \cdot b(i) + \varphi_{i-1}^{n+1} \cdot c(i) + d(i) \quad [20a]$$

avec

$$d(i) = \left(\frac{dw}{d\varphi} \right)_i \cdot \frac{\delta x}{\delta t} \cdot \varphi_i^n \quad [20b]$$

$$c(i) = \frac{D_{\varphi w}}{\delta x_w} + \frac{\delta_{pw}}{\delta x_w} \cdot p_{sat,i-1} \quad [20c]$$

$$b(i) = \frac{D_{\varphi e}}{\delta x_e} + \frac{\delta_{pe}}{\delta x_e} \cdot p_{sat,i+1} \quad [20d]$$

$$a(i) = \frac{D_{\varphi e}}{\delta x_e} + \frac{\delta_{pe}}{\delta x_e} \cdot p_{sat,i+1} + \frac{D_{\varphi w}}{\delta x_w} + \frac{\delta_{pw}}{\delta x_w} \cdot p_{sat,i-1} + \left(\frac{dw}{d\varphi} \right)_i \cdot \frac{\delta x}{\delta t} \quad [20e]$$

Soit un paramètre scalaire k (λ , δ_p ou D_ϕ), les valeurs k_w et k_e sont définies par :

$$\frac{\delta x_e}{k_e} = \frac{\delta x_e^+}{k_{i+1}} + \frac{\delta x_e^-}{k_i} \quad [21a]$$

$$\frac{\delta x_w}{k_w} = \frac{\delta x_w^+}{k_i} + \frac{\delta x_w^-}{k_{i-1}} \quad [21b]$$

Le système discrétisé est résolu par une procédure itérative : les champs de température et d'humidité relative sont obtenus par une procédure de type TDMA, les propriétés du matériau en tous points du domaine sont mises à jour et les champs de température et d'humidité relative sont recalculés. On procède ainsi jusqu'à atteindre les critères de convergence (ici, résidus sur la température et l'humidité relative inférieurs à 10^{-6})

2.5. Conditions limites

Dans le cas d'une application du modèle à une paroi de bâtiment, les conditions limites sur la température et sur l'humidité relative sont de la 3^{ème} espèce (conditions de Fourier). Nous présentons ici les équations pour la face gauche du mur ($x = 0$), la démarche reste identique pour la face droite. Ainsi, la condition limite pour le transfert de chaleur à $x = 0$ s'écrit :

$$q = \alpha \cdot (T_a - T_0) = -\lambda \frac{(T_1 - T_0)}{\delta x_{01}} \quad [22]$$

α	: coefficient de transfert de chaleur	$W.m^{-2}.K^{-1}$
T_a	: Température de l'air ambiant	K
δx_{01}	: Distance séparant les nœuds 0 et 1	M

Cette équation donne alors :

$$a(0) = \alpha + \frac{\lambda}{\delta x_{01}} \quad [23a]$$

$$b(0) = \frac{\lambda}{\delta x_{01}} \quad [23b]$$

$$c(0) = 0 \quad [23c]$$

$$d(0) = \alpha \cdot T_a \quad [23d]$$

Pour le transfert de masse, une analogie avec l'équation [22] est usuellement établie :

$$g_v = \beta \cdot (p_{\text{sat},a} \cdot \varphi_a - p_{\text{sat},0} \cdot \varphi_0) = -\delta_p \cdot \frac{\varphi_1 \cdot p_{\text{sat},1} - \varphi_0 \cdot p_{\text{sat},0}}{\delta x_{01}} \quad [24]$$

où β : coefficient de transfert de masse $\text{Kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}.\text{Pa}^{-1}$
 p_{va} : pression partielle de l'air ambiant Pa

Ainsi, l'équation [24] donne :

$$a(0) = \left(\beta + \frac{\delta_p}{\delta x_{01}} \right) \cdot p_{\text{sat},0} \quad [25a]$$

$$b(0) = \frac{\delta_p}{\delta x_{01}} \cdot p_{\text{sat},1} \quad [25b]$$

$$c(0) = 0 \quad [25c]$$

$$d(0) = \beta \cdot p_{\text{sat},a} \cdot \varphi_a \quad [25d]$$

3. Validation du modèle

L'article présente ici les résultats de notre modèle sur un cas test simple proposé lors d'un benchmark nommé HAMSTAD WP2 (Cornick, 2006). Ce projet comporte 5 exercices d'analyse numérique afin d'évaluer la performance de modèles numériques unidimensionnels de transfert de chaleur, d'air et d'humidité. Notre choix s'est porté sur l'exercice 2 dont les résultats de la solution analytique sont fournis.

3.1. Présentation du cas

Ce test numérique consiste à modéliser un mur homogène de 20 cm d'épaisseur sous conditions isothermes ($T = 20^\circ\text{C}$) en 1D. Initialement, le mur est en équilibre avec les ambiances dont l'humidité relative est égale à 95%. A $t > 0$, les ambiances sont soudainement modifiées : l'ambiance extérieure est fixée à 45% et l'ambiance intérieure est donnée à 65%.

Le mur est constitué d'un matériau dont les caractéristiques hygrothermiques sont répertoriées dans le tableau suivant :

Paramètre	Equation ou valeur	unité
Masse volumique	$\rho_0 = 525$	kg.m^{-3}
Capacité thermique massique	$C = 800$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Isotherme de sorption	$w = \frac{116}{\left(1 - \frac{1}{0,118} \cdot \ln(\varphi)\right)^{0,869}}$	kg.m^{-3}
Perméabilité à la vapeur	$\delta_p = 1,0 \cdot 10^{-15}$	S
Coefficient de diffusion	$D_w = 6,0 \cdot 10^{-10}$	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
Conductivité thermique	$\lambda = 0,15$	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$

Tableau 1 : Valeurs des paramètres hygrothermiques du matériau constituant le mur du cas test.

Pour les échanges ambiance/matériau, les coefficients de transfert de surface thermique et massique sont précisés : $\alpha = 25 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ et $\beta = 1.0 \cdot 10^{-3} \text{ s / m}$.

Les participants au benchmark sont :

- l'université de Louvain (Belgique), KUL
- l'université de technologie Chalmer (Suède), CTH
- l'organisation néerlandaise de la recherche scientifique appliquée (Pays bas), TNO
- l'université technique de Dresde (Allemagne), TUD
- le Conseil National de Recherches (Canada), NRC

3.2. Résultats numériques

Les profils d'humidité sont tracés à 100 h, 300 h et 1000 h sur la figure 2. Les résultats de la simulation numérique donnés par TMC sont en parfait accord avec ceux de la solution analytique fournie par le Benchmark ainsi que ceux des autres codes numériques. Les résultats indiquent donc une bonne performance du code TMC et sont encourageants pour la suite de notre travail.

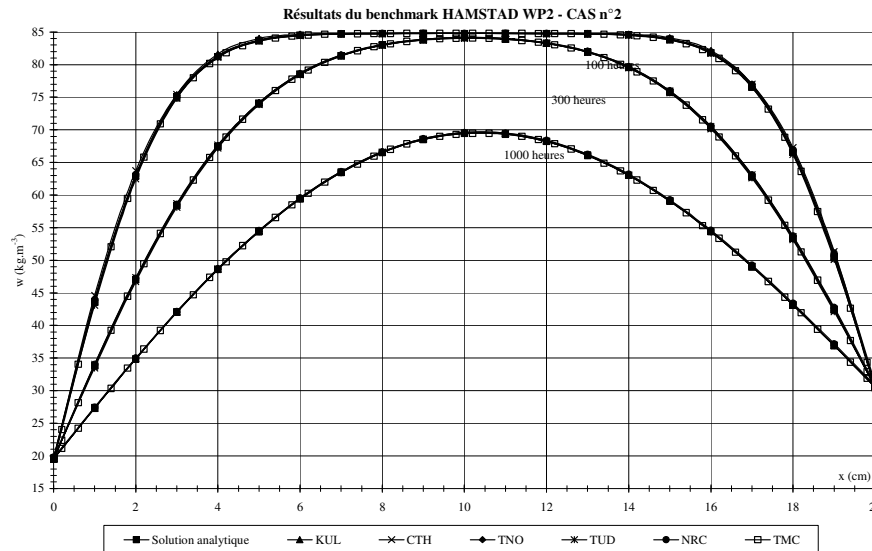


Figure 2 : Résultats du benchmark HAMSTAD WP2 – Comparaison du code TMC à d'autres codes existants.

4. Conclusion

Ce travail permet de valider le comportement de notre code de calcul pour un cas simplifié de transfert de masse sous conditions isothermes en régime instationnaire. Ceci n'est qu'une étape dans la validation de notre code de calcul. Il nous reste maintenant à envisager la confrontation de notre code de calcul sur des cas plus généraux non isothermes avec prise en compte de la teneur en eau sur les paramètres tels que la conductivité thermique, la perméabilité à la vapeur et la diffusion liquide. En outre, le modèle utilise une isotherme de sorption unique, sans distinguer la courbe adsorption et de désorption qui peuvent présenter de fortes hystérésis. De plus, les domaines usuels de températures des matériaux impliquent une prise en compte de l'influence de la température sur la courbe de sorption.

5. Bibliographie

Cammerer J., Achziger J., « Effect of the moisture content on the thermal conductivity of building materials and insulation products », *Kurzberichte aus der Bauforschung*, Bericht N°. 115, p 491-494, (1985).

- Collet F., Bart M., Moissette S., Serres L., « Conductivité thermique de matériaux à faibles impacts environnementaux, Modélisation par méthode auto-cohérente » *VIIème Colloque Interuniversitaire Franco-Québécois (CIFQ) – Thermique des systèmes, Saint-Malo, France*, p. 449-454, (2005).
- Collet F., Bart M., Serres L., Miriel J., « Porous structure and water vapour sorption of hemp-based materials », *Construction and Building Materials*, vol. 22, p 1271-1280, 2008.
- Cornick S., « Results of the HAMSTAD Benchmarking Exercises Using hygIRC 1-D version 1.1 », mai 2006.
- Kunzel H. M., « Simultaneous heat and moisture transport in building components », Fraunhofer IRB Verlag Stuttgart, ISBN 3-8167-4103-7, (1995).
- Kunzel, H. M., « Does the volume-related or the mass-related moisture content determine the thermal conductivity of building materials? », *Bauphysik* 8, Vol. 2, p. 33-39, (1986).
- McLean R. C., Galbraith G. H., Sanders C., « Moisture transmission testing of building materials and the presentation of vapour permeability values », *Building Research and Practice. The journal of CIB*, n°2, (1990).